

Seminar zur Vorlesung

# Anorganische Chemie III

Wintersemester 2017/18

Christoph Wölper

Institut für Anorganische Chemie der Universität Duisburg-Essen

# Wiederholung

---

## Was bisher geschah

### # mathematische Gruppen

- Kristallklassen/Punktgruppen
- Raumgruppen (spezielle Lagen ...)

### # dichte und dichteste Kugelpackungen

- 6 bis 12 nächste Nachbarn
  - ⇒ Kuboktaeder (12)
  - ⇒ Antikuboktaeder (12)
  - ⇒ Würfel (8)
  - ⇒ Oktaeder (6)
- Symmetrie der Grundkörper gibt Gittertyp vor
  - ⇒ Kuboktaeder  $\mapsto$  kubisch F
  - ⇒ Antikuboktaeder  $\mapsto$  hexagonal
  - ⇒ Würfel  $\mapsto$  kubisch I
  - ⇒ Oktaeder  $\mapsto$  kubisch P

# Strukturtypen

---

## Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$

# 2 unabhängige spezielle Lagen mit oktaedrischer Punktsymmetrie

→ bei  $0\ 0\ 0$  (Wyckoff 4a)

⇒ symmetriäquivalente Lagen bei  $0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$  und  $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$

⇒ also alle Ecken und Flächenmitten der Elementarzelle bzw. alle Gitterpunkte

→ bei  $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$  (Wyckoff 4b)

⇒ symmetriäquivalente Lagen bei  $0\ 0\ \frac{1}{2}$ ,  $0\ \frac{1}{2}\ 0$  und  $\frac{1}{2}\ 0\ 0$

⇒ also die Raummitte und alle Kantenmitten

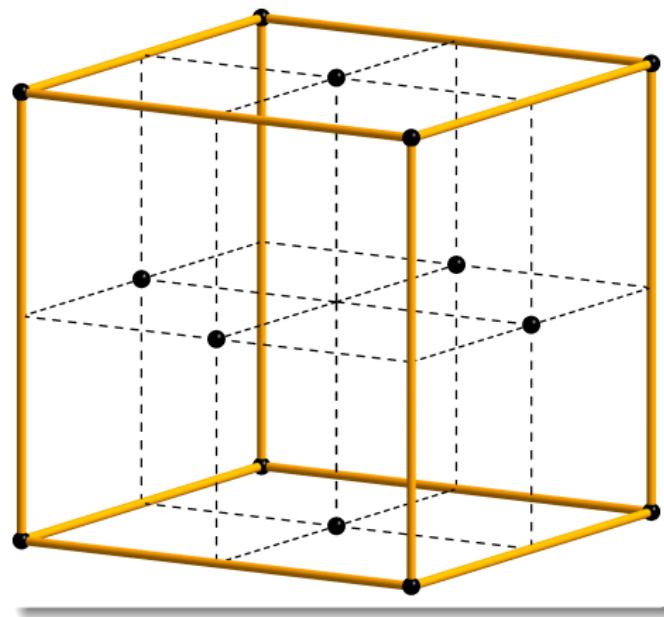
# eine spezielle Lage mit tetraedrischer Punktsymmetrie

→ bei  $\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$  (Wyckoff 8c)

⇒ symmetriäquivalente Lagen bei  $\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}$ ,  $\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}$ ,  $\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}$ ,  $\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}$ ,  $\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}$  und  $\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4}$

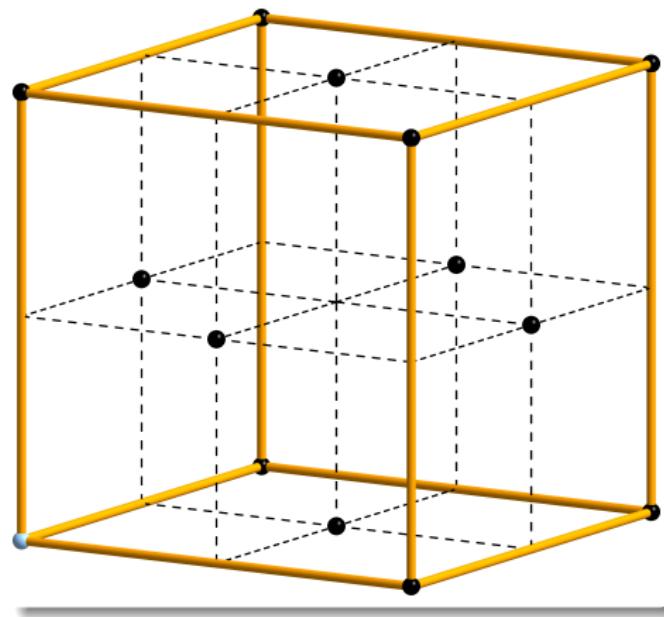
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



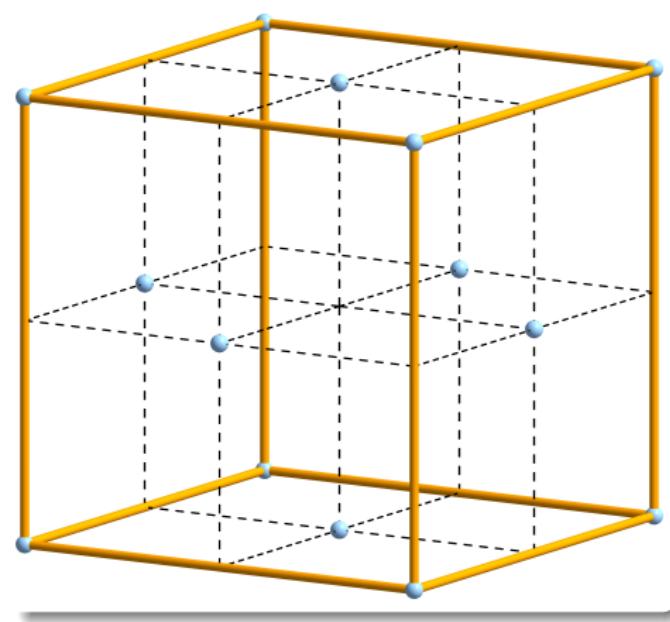
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



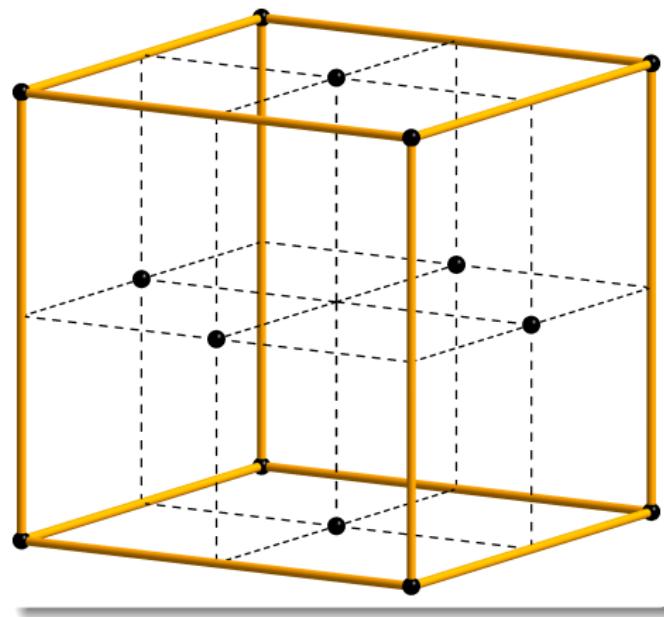
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



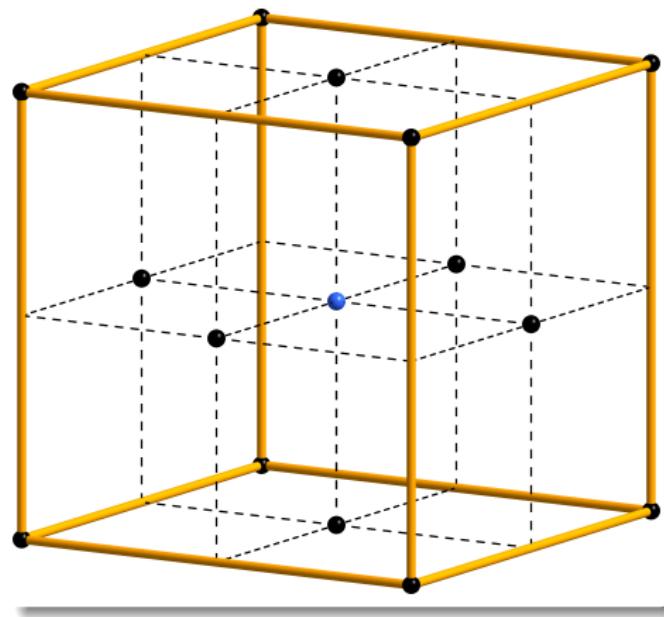
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



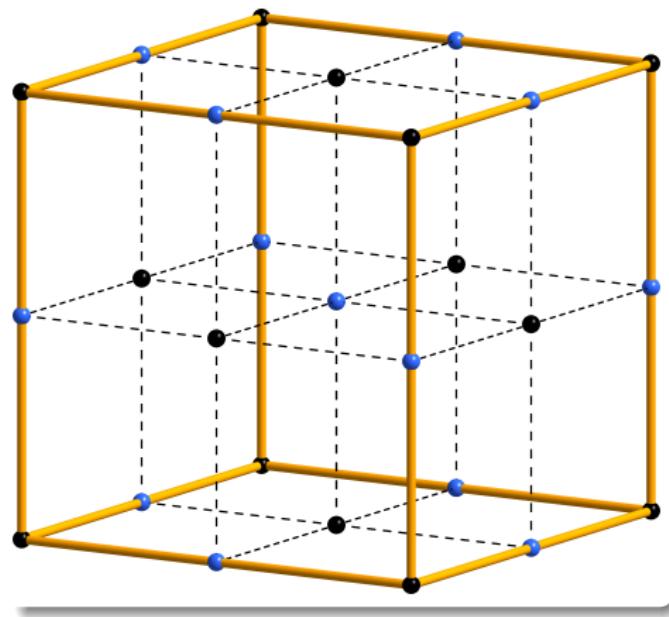
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



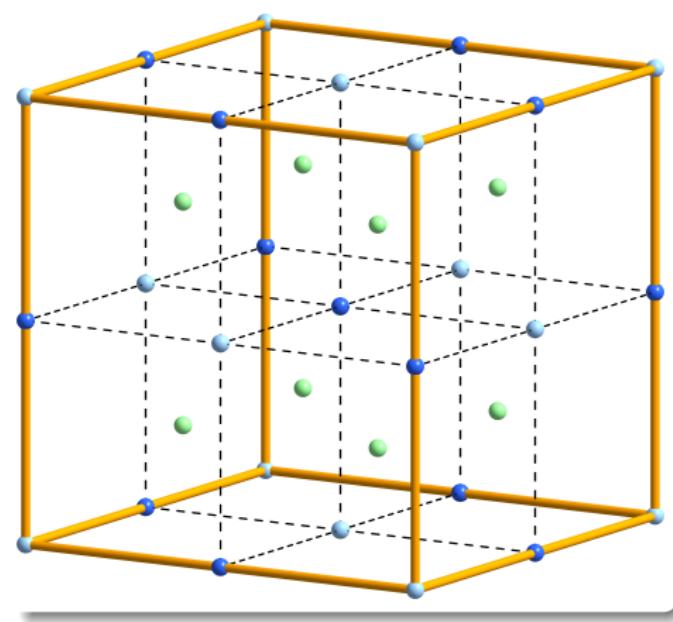
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



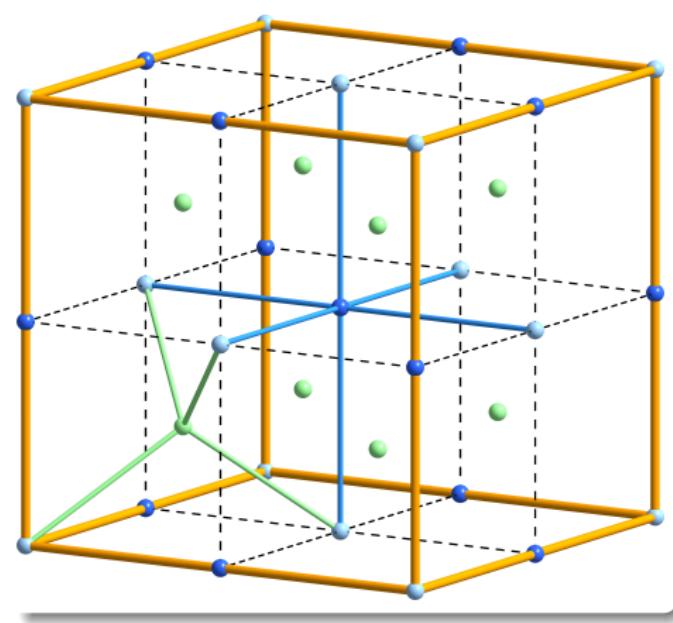
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



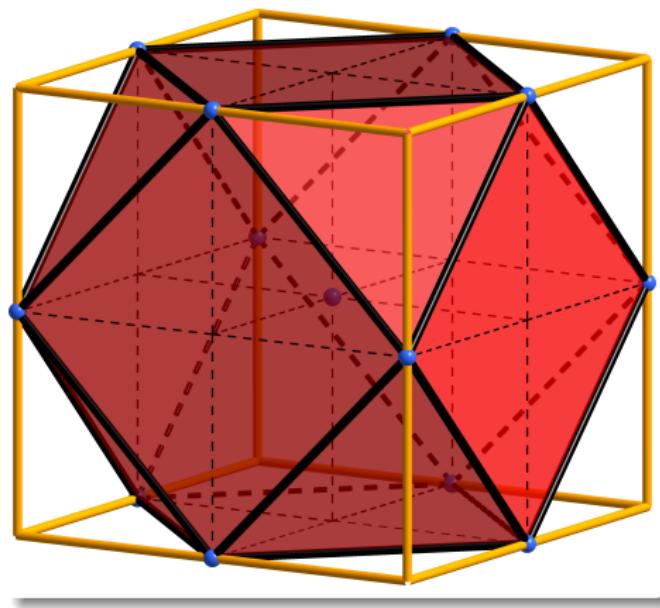
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



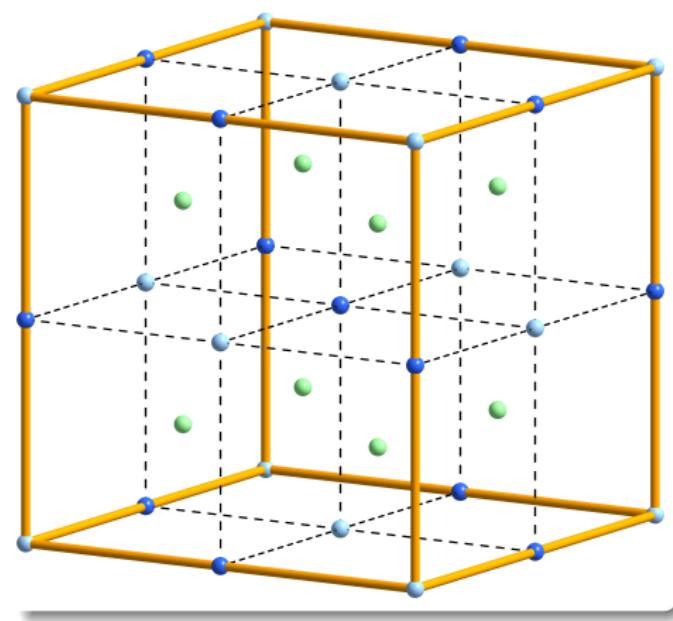
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



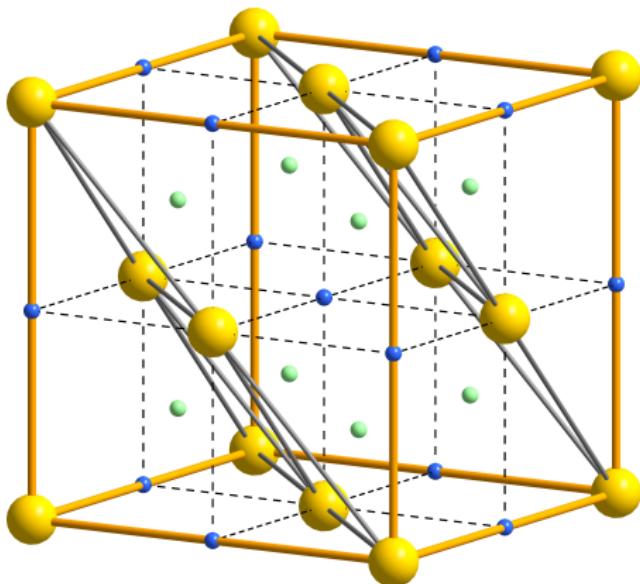
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



# Strukturtypen

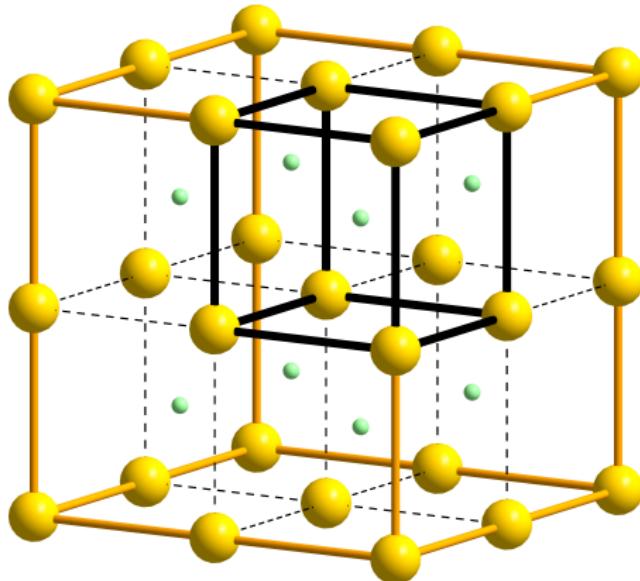
Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



- # ein Atom auf 4a
- # Struktur vieler Metalle
  - Münzmetalle
  - Nickel-Gruppe
  - Rhodium, Iridium
  - Calcium, Strontium
  - Blei
  - Aluminium

# Strukturtypen

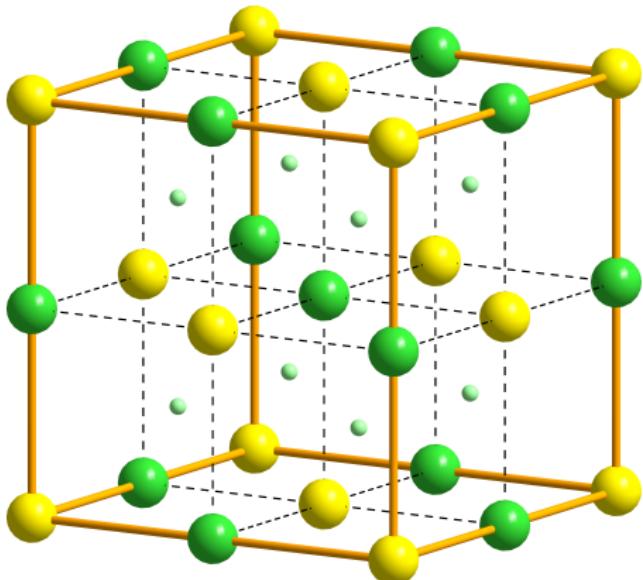
## Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



- # Besetzung beider Lagen mit Oktaedersymmetrie mit gleichen Atomen ändert die Symmetrie
  - „Tetraederlücke“ hat jetzt oktaedrische Symmetrie!
- # neue Elementarzelle
  - $1/8$  der alten Zelle
  - nicht mehr flächen-zentriert
- # neue Raumgruppe  $Pm\bar{3}m$

# Strukturtypen

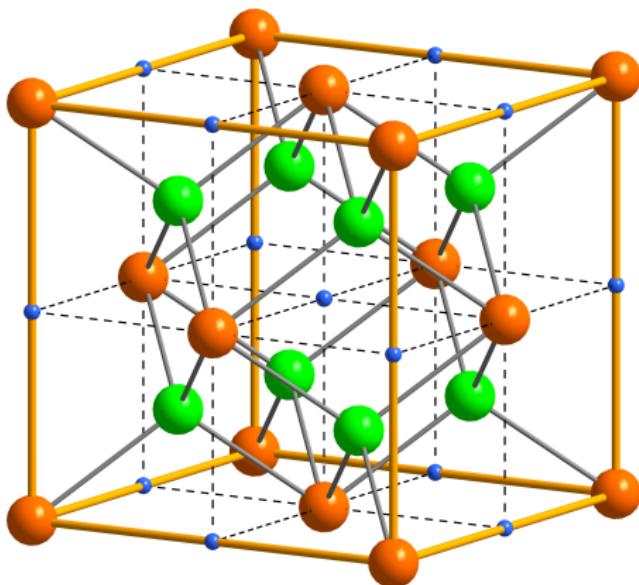
Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



# bei Besetzung von 4a und 4b mit verschiedenen Atomen ergibt sich die NaCl-Struktur

# Strukturtypen

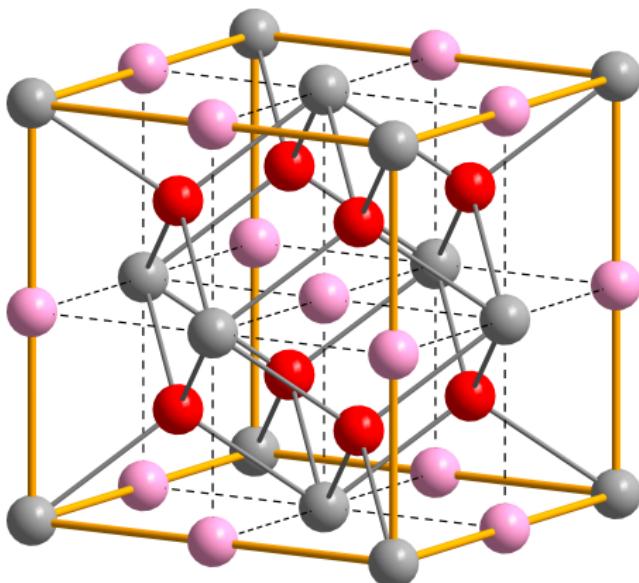
Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



- # zweite Atomsorte besetzt Lagen mit tetraedrischer Symmetrie (8c)  
→  $CaF_2$ -Struktur
- # 4 Lagen mit Oktaedersymmetrie
- # 8 Lagen mit Tetraedersymmetrie
- #  $AB_2$ -Struktur

# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



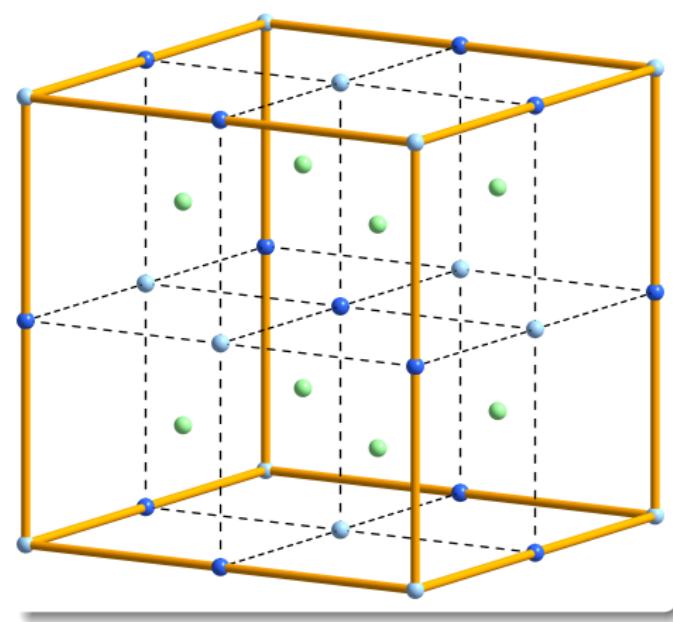
Bi

Li

- # zweite Atomsorte besetzt Lagen mit tetraedrischer Symmetrie und die mit oktaedrischer  
→  $BiLi_3$ -Struktur
- # Verhältnis von 4:12  
→  $AB_3$ -Struktur
- # zwei unabhängige Li-Atome

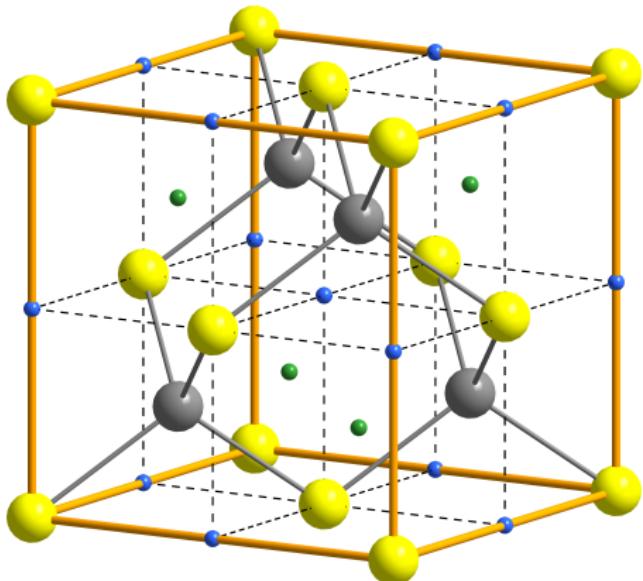
# Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert  $Fm\bar{3}m$



# Strukturtypen

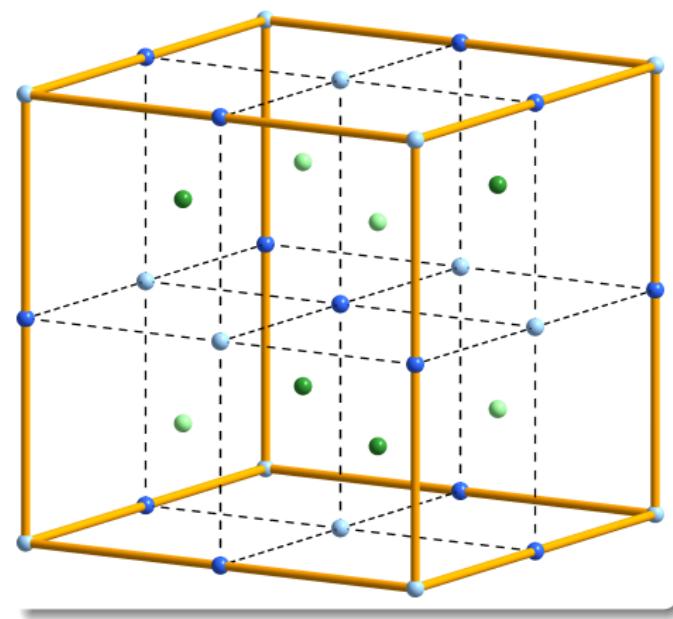
## Zinkblende und Diamant



- # nur die Hälfte der Tetraederlücken besetzt
  - Problem: alle äquivalent
  - es sollten alle oder gar keine besetzt sein
- # Änderung der Symmetrie
  - je 4 der Tetraederlücken äquivalent
  - neue Raumgruppe  $F\bar{4}3m$
  - Spiegelebenen senkrecht zu den Achsen fehlen

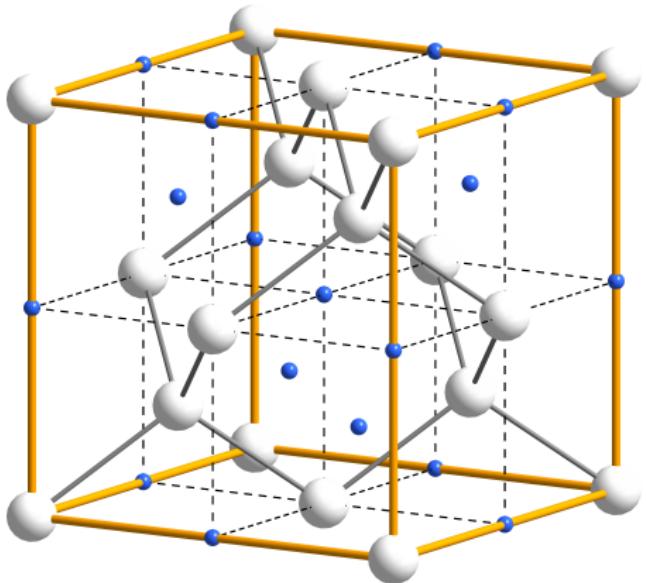
# Strukturtypen

Zinkblende und Diamant



# Strukturtypen

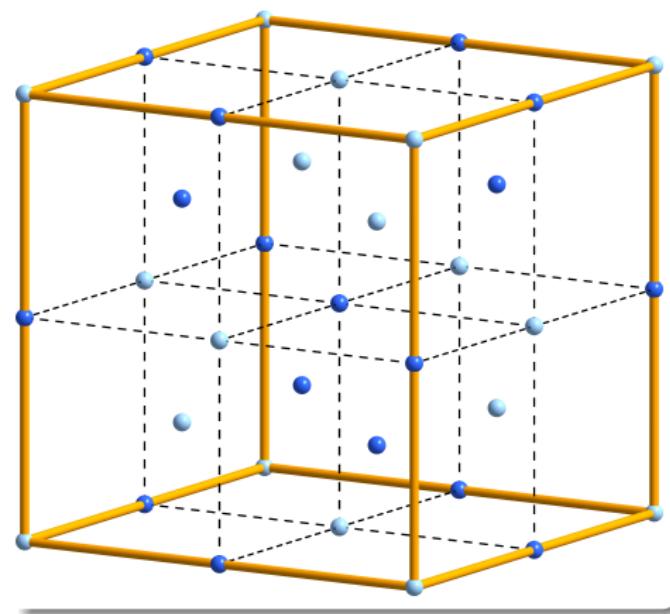
## Zinkblende und Diamant



- # „Zn“ und „S“ Position sind jetzt äquivalent
  - Änderung der Symmetrie
  - zusätzliche d-Gleitspiegelebene
  - neue Raumgruppe  $Fd\bar{3}m$

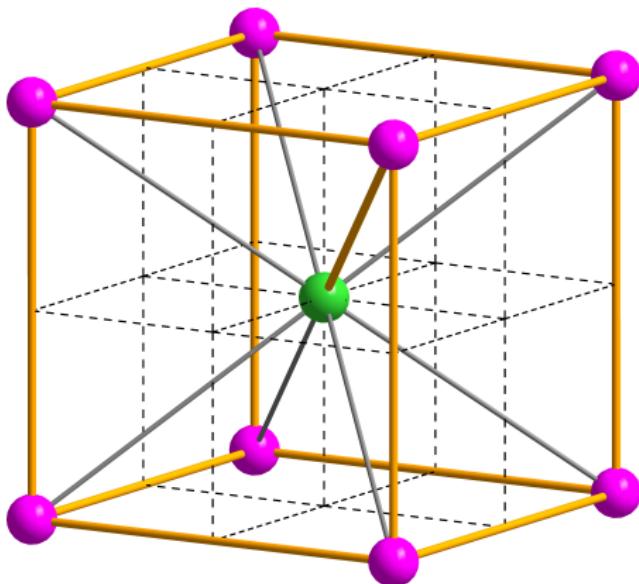
# Strukturtypen

Zinkblende und Diamant



# Strukturtypen

Kubisch primitiv  $Pm\bar{3}m$



- # keine dichteste Packung
- # primitiv(!)

# Strukturtypen

Kubisch primitiv  $Pm\bar{3}m$

